

文章编号:1000-8055(2011)10-2258-09

正癸烷预混燃烧的详细反应动力学数值模拟

曾 文¹, 刘静忱¹, 陈潇潇¹, 解茂昭²

(1. 沈阳航空航天大学 动力与能源工程学院, 沈阳 110136;

2. 大连理工大学 能源与动力学院, 辽宁 大连 116024)

摘 要: 提出了正癸烷预混燃烧的详细化学反应机理,并对正癸烷预混燃烧过程进行了数值计算.同时,详细分析了反应物、主要生成物及多种中间组分摩尔分数的变化趋势,并分别与采用正癸烷与航空煤油为燃料的燃烧火焰的实验结果进行了对比分析.结果表明,正癸烷与航空煤油预混燃烧火焰中反应物与生成物摩尔分数的变化趋势基本一致;通过数值计算所得到的主要反应物与生成物摩尔分数的变化趋势与两种燃料(正癸烷与航空煤油)燃烧火焰的实验值基本吻合,说明该详细反应机理能很好地反映正癸烷预混燃烧过程的详细动力学特性.同时,通过反应流分析发现,正癸烷的消耗主要通过热裂解反应以及 H, OH 自由基的提取反应来实现.

关 键 词: 正癸烷; 预混燃烧; 数值模拟; 详细化学反应机理; 反应流分析

中图分类号: TK401

文献标志码: A

Detailed reaction kinetic modeling of *n*-decane premixed combustion

ZENG Wen¹, LIU Jing-chen¹, CHEN Xiao-xiao¹, XIE Mao-zhao²

(1. College of Power and Energy Engineering,

Shenyang Aerospace University, Shenyang 110136, China;

2. School of Energy and Power Engineering,

Dalian University of Technology, Dalian Liaoning 116024, China)

Abstract: A detailed reaction mechanism for the premixed combustion of *n*-decane was compiled and the process of *n*-decane premixed combustion was simulated. The mole fractions of the reactants, the major combustion products and the intermediate species were analyzed. At the same time, the simulation results were compared with the experimental data of the *n*-decane and kerosene premixed flames, respectively. The results show that the shapes of the profiles of the mole fractions of the reactants and the major combustion products in *n*-decane flame agree with that in kerosene flame. The simulated profiles of the mole fractions of the reactants and the major combustion products agree with the experimental data of the *n*-decane and kerosene flames, showing that this detailed reaction mechanism can well reflect the detailed kinetic characteristics of *n*-decane premixed combustion. Furthermore, through net reaction rate analysis, it's found that major paths consuming *n*-decane are implemented through thermal decomposition and abstraction of H and OH.

Key words: *n*-decane; premixed combustion; numerical simulation;
detailed chemical reaction mechanism; reaction rate analysis

收稿日期:2010-11-25; 修订日期:2011-02-22

基金项目:国家自然科学基金(50906059); 中国博士后科学基金(20080430733)

作者简介:曾文(1977—),男,湖南沅江人,副教授,博士后,主要从事航空发动机燃烧过程与排放物生成的数值研究.

航空煤油的成分非常复杂,包括烷烃、环烷烃、芳香烃以及多环芳烃等不同种类的多种成分^[1],研究表明它主要由平均碳原子个数为 10~16 的多种碳氢化合物构成,其详细化学反应机理(亦简称详细反应机理)涉及几百种组分、上千个基元化学反应^[2]。同时,航空发动机燃烧室内是非预混的湍流火焰,要想通过综合考虑如此庞大的化学反应详细机理与复杂流场,并对航空煤油的燃烧过程进行完整、准确的数值计算是极为困难的^[3]。因此如何选择数值模拟代用燃料并合理简化其化学反应机理是进行航空煤油燃烧过程详细动力学数值模拟的关键。

近年来,国外学者对航空煤油数值模拟代用燃料的燃烧特性进行了大量的实验和数值研究^[4-7],其中代用燃料主要采用正癸烷($n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$)。Delfau 等^[8]对正癸烷在平板火焰燃烧炉(flat flame burner)内的燃烧过程进行了实验与数值研究,得到了反应物、主要生成物及各中间组分摩尔分数的变化趋势,同时提出了一种较为简单的化学反应机理。Dagaut 等^[9-10]对正癸烷在喷射搅拌反应器内(JSR)的燃烧过程进行了实验与数值研究,在实验中,采用的压力为 10 个大气压,温度范围为 550~1150 K,当量比为 0.1~1.5,同时,提出了一种较为详细的化学反应机理,包括 90 种组分、573 个基元反应。Pfahl 等^[11]对正癸烷在激波管(shock tube)内的燃烧过程进行了实验研究,详细分析了当量比、反应温度对着火延迟时间的影响。Lindstedt 等^[12]对正癸烷、苯、甲苯以及正癸烷、苯、乙苯的混合气体在预混平板火焰中的燃烧过程进行了数值模拟,提出了一种更为详细的化学反应机理,包括 193 种组分、1085 个基元反应。

依据 Bikas 等^[13]提出的正癸烷着火与燃烧的化学反应详细机理(包括 67 种组分、600 个反应),并综合考虑 Honnet 等^[14]对之提出的修改,形成了本文所采用的正癸烷预混燃烧的详细化学反应机理,包括 67 种组分、344 个反应。采用该反应机理对正癸烷的预混燃烧过程进行了详细的数值计算,并分别与采用正癸烷或航空煤油为燃料的实验数据进行了对比分析,为航空发动机燃烧与排放物生成过程的详细动力学数值研究提供了一定的理论依据。

1 数学模型

本文主要对燃烧炉内正癸烷预混燃烧过程进行数值计算,其主要控制方程^[15]为

连续性方程

$$\dot{M} = \rho u A \quad (1)$$

能量方程

$$\dot{M} \frac{dT}{dx} - \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left[\lambda A \frac{dT}{dx} \right] + \frac{A}{c_p} \sum_{i=1}^{k_g} \dot{w}_i h_i W_i + \frac{A}{c_p} \sum_{i=1}^{k_g} \rho Y_i V_i c_{pi} \frac{dT}{dx} = 0 \quad (2)$$

组分方程

$$\dot{M} \frac{dY_i}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho A Y_i V_i) - A \dot{w}_i W_i = 0 \quad (3)$$

其中反应速度为

$$\dot{w}_i = \sum_{k=1}^{N_g} v_{ik} k_{fk} \prod_{j=1}^{k_g} [X_j]^{v'_{jk}} \quad (i = 1, \dots, k_g) \quad (4)$$

其中 $v_{ik} = v''_{ik} - v'_{ik}$, $[X_j]$ 为第 j 组分的摩尔分数。

气体状态方程

$$\rho = \frac{p \bar{W}}{RT} \quad (5)$$

式中 $\dot{M}$ 为质量流率; T, p 分别为温度、压力; $Y_i, W_i, h_i, V_i, \dot{w}_i$ 分别为第 i 种组分的质量分数、摩尔质量、比焓、扩散速率、反应速率; $\bar{W}$ 为混合物平均分子质量; R 为通用气体常数; λ, c_p 分别为混合物导热系数、比定压热容; u, ρ 分别为混物流体流速、密度; A 为火焰的横截面积; k_g, N_g 分别为组分总数和反应步总数。

2 化学反应机理

航空煤油的成分非常复杂,是由上百种碳氢化合物组成,包括烷烃、环烷烃、芳烃以及多环芳烃等,到目前为止还没有描述航空煤油燃烧的详细反应机理。如果要对航空煤油的燃烧过程进行详细动力学数值模拟,只能采用航空煤油的表征燃料(或替代燃料)。由于长链脂肪族($n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$) 在航空煤油各成分中占据非常大的比重,同时其物理特性和化学特性与航空煤油极其相似,因此,在本文中,选定正癸烷($n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$) 作为航空煤油的数值模拟替代燃料,构建其详细化学反应机理,对其预混火焰进行数值计算,并分别与以正癸烷和航空煤油作为燃油的实验结果进行对比分析。

3 计算结果与分析

燃烧炉内准一维常压稳定的层流预混火焰的具体计算参数为:反应物组成为 3.2% $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$, 28.57% O_2 与 68.23% N_2 (体积分数),混合气流

量为 $10.74 \times 10^{-3} \text{ g}/(\text{cm}^2 \cdot \text{s})$, 初始压力为 $1.0135 \times 10^5 \text{ Pa}$.

实验装置及结构可参见文献[16], 其中主要的实验参数为: 正癸烷燃烧火焰中, $n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 的流量为 $1.15 \text{ cm}^3/\text{s}$, O_2 的流量为 $10.3 \text{ cm}^3/\text{s}$, N_2 的流量为 $24.6 \text{ cm}^3/\text{s}$, 初始压力为 $1.0135 \times 10^5 \text{ Pa}$. 航空煤油燃烧火焰中, 航空煤油 (Jet A1) 由 79% $n\text{-alkanes}$ (烷烃)、10% cycloalkanes (环烷烃)、11% aromatics (芳香烃) 组成, 航空煤油的流量为 $1.06 \text{ cm}^3/\text{s}$, O_2 的流量为 $10.3 \text{ cm}^3/\text{s}$, N_2 的流量为 $24.6 \text{ cm}^3/\text{s}$, 当量比为 1.7, 初始压力为 $1.0135 \times 10^5 \text{ Pa}$.

3.1 燃烧温度

实验测得预混燃烧炉中温度分布如图 1 所示. 在数值计算中, 采用实验[16]测得的炉内温度分布曲线作为温度输入文件, 从而在考虑炉壁散热的基础上不再需要求解能量方程(式(2)). 从图 1 可以看出, 在两种火焰中, 炉壁温度都为 800 K, 同时, 两种火焰中燃烧温度分布趋势基本一致, 在距离炉壁 0.15 cm 之前, 随着与炉壁距离的增加, 火焰温度急剧上升, 在距离炉壁 0.15 cm 之后, 火焰温度基本保持不变. 同时, 航空煤油燃烧火焰中火焰最高温度比正癸烷火焰中火焰最高温度高约为 50 K.

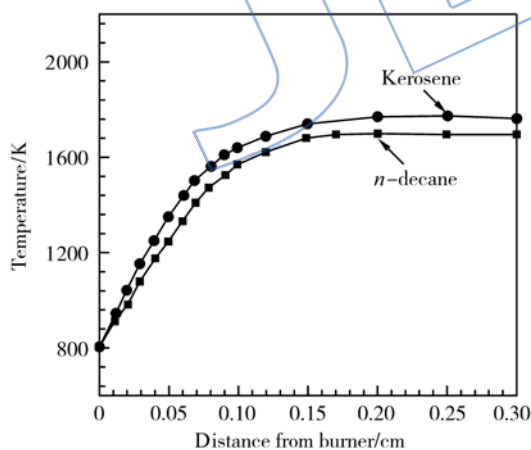


图 1 预混燃烧炉内实验温度分布

Fig. 1 Experimental temperature profile in the premixed combustion burner

3.2 反应物

图 2 显示了炉内反应物摩尔分数的变化趋势. 在正癸烷火焰中, 距离炉壁分别为 0.1 cm 与 0.2 cm 处, 正癸烷与氧气基本被完全消耗, 而在航空煤油燃烧火焰中, 距离炉壁约为 0.25 cm 处

时氧气才被完全消耗掉; 同时, 数值计算结果与实验值基本吻合. 在航空煤油燃烧火焰的实验测试中, 由于航空煤油为多种组分的混合物, 其摩尔分数的变化趋势无法精确测定, 因此在图 2(b) 中, 并没有显示航空煤油摩尔分数变化趋势的实验值.

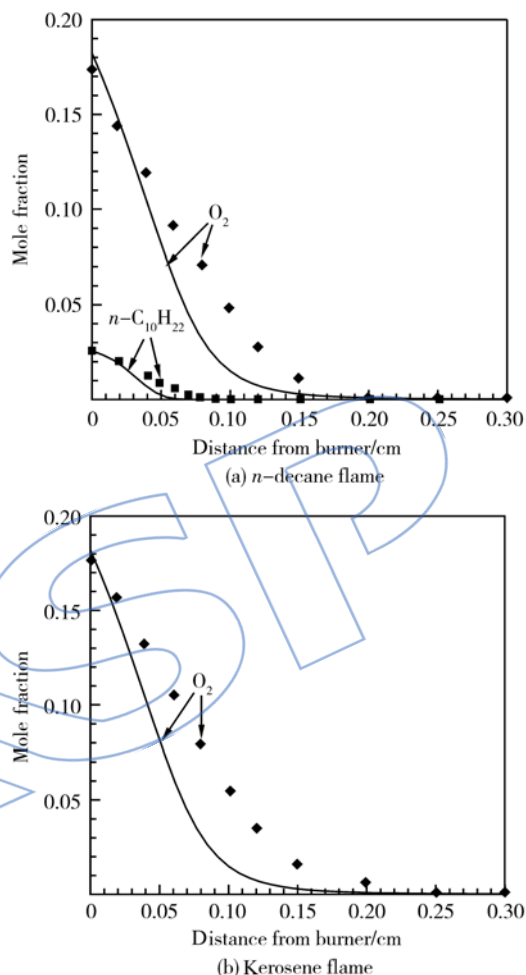


图 2 反应物摩尔分数的变化趋势(图中实线为计算值, 符号为实验值[16])

Fig. 2 Mole fractions of reactants (lines: computed data, points: experimental data from Ref. [16])

正癸烷的消耗主要通过热裂解反应以及 H , OH 自由基的提取反应来实现. 如图 3 所示, 图中 R318, R322, R328 的曲线分别与 R317, R323, R329 的曲线重合. 从图中可以看出, 反应步 R328 与 R329 是促进正癸烷消耗的主要途径, 占总消耗速率的 67.4%; 反应步 R322 与 R323 同样也是促进正癸烷消耗的途径, 占总消耗速率的 27.6%; 燃料的热裂解反应, 如反应步 R317 与 R318 在促进燃料消耗方面所起的作用不是很大, 仅占燃料总消耗速率的 4.6%. 因此, 反应过程中所产生的 H , OH 自由基在很大程度上促进了燃料的燃烧.

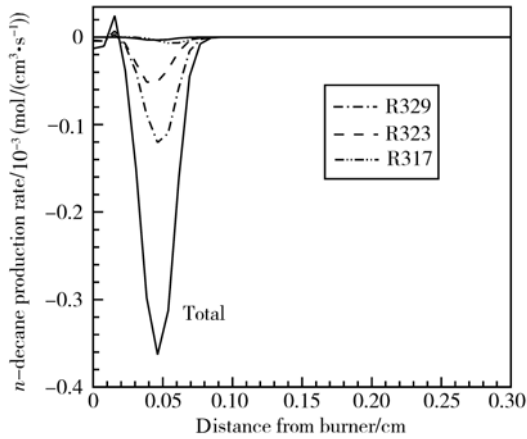
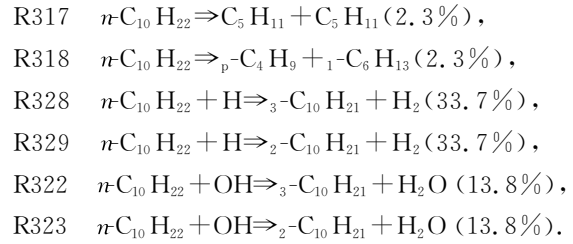


图 3 主要反应步对正癸烷生成速率的影响

Fig. 3 Effect of the main reaction path on the production rate of *n*-decane



3.3 CO, CO₂, H₂, H₂O

图 4 显示了 CO, CO₂, H₂, H₂O 摩尔分数的变化趋势。

在正癸烷火焰中,如图 4(a),(c)所示,CO 与 CO₂ 摩尔分数的计算值与实验值较为吻合;H₂ 的摩尔分数在靠近炉壁附近,计算值要高于实验值,而在远离炉壁处则要低;H₂O 的摩尔分数的计算值高于实验值,但整体变化趋势比较吻合。

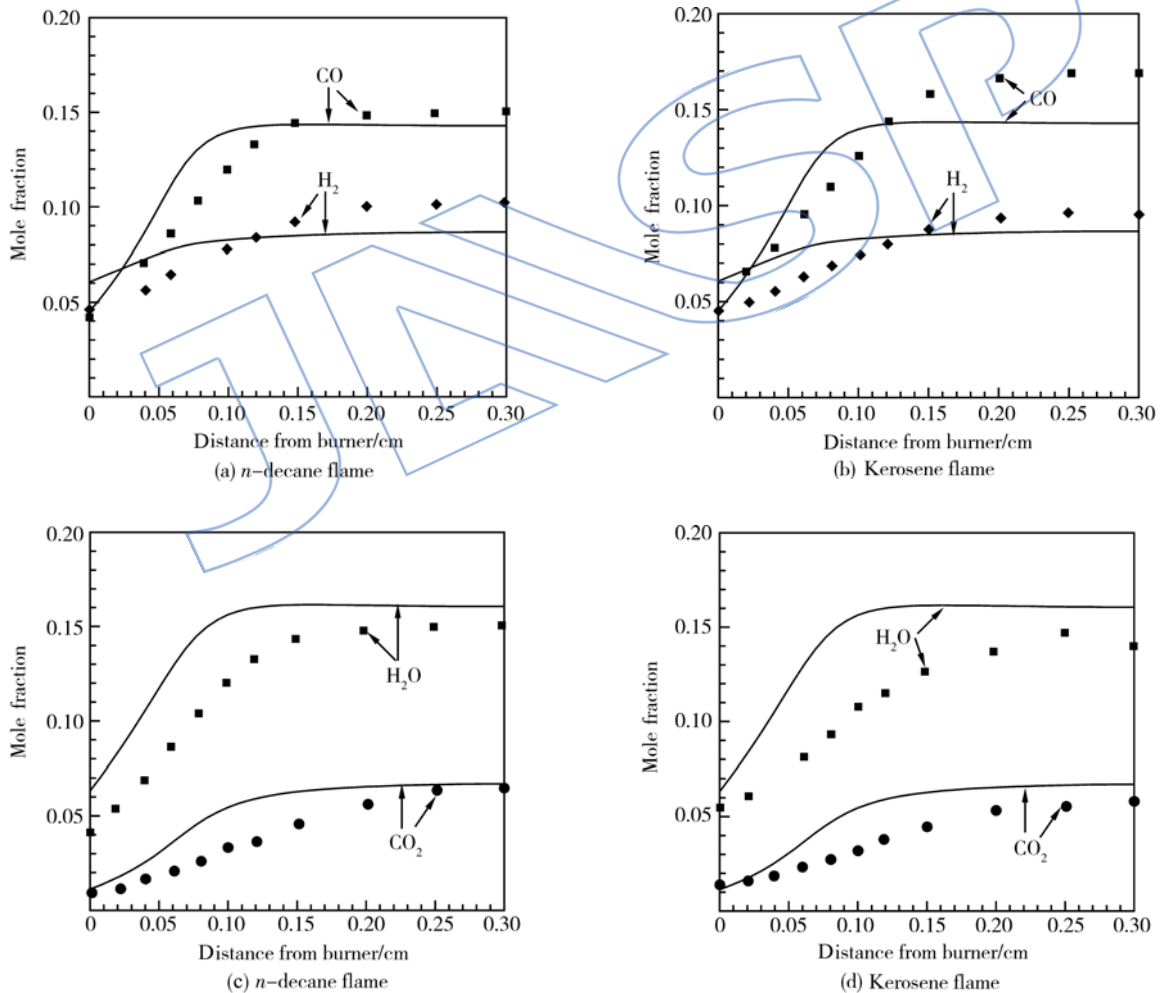
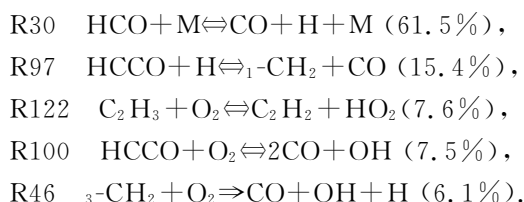
图 4 CO, CO₂, H₂, H₂O 摩尔分数的变化趋势(实线为计算值,符号为实验值^[16])

Fig. 4 Mole fractions of CO, CO₂, H₂, H₂O (lines; computed data, points; experimental data from Ref. [16])

从图 4(b), (d) 可以看出, 航空煤油燃烧火焰中 CO_2 , H_2 , H_2O 摩尔分数的变化趋势基本与正癸烷火焰一致, 但 CO 摩尔分数的变化趋势则有所差别, 在远离炉壁处计算值与实验值差异较大, 但整体变化趋势较为吻合。

图 5 显示了 CO 生成与消耗的主要反应步。 CO 主要通过下列反应步生成:



通过反应步 R20 消耗



从上述分析可以发现, CO 主要通过反应步 R30 生成, 通过该反应步 CO 的生成速率占总生成速率的 61.5%; 主要通过反应步 R20 消耗。

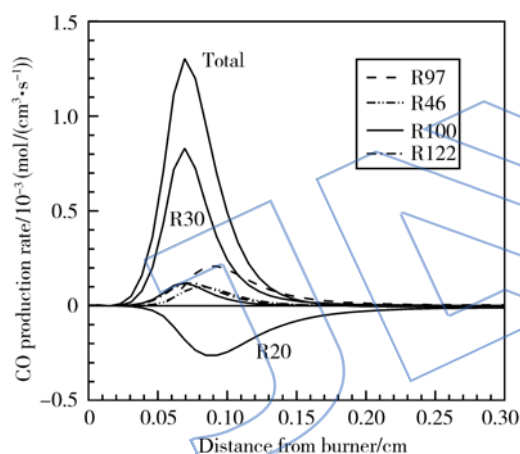


图 5 主要反应步对正癸烷火焰中 CO 生成速率的影响

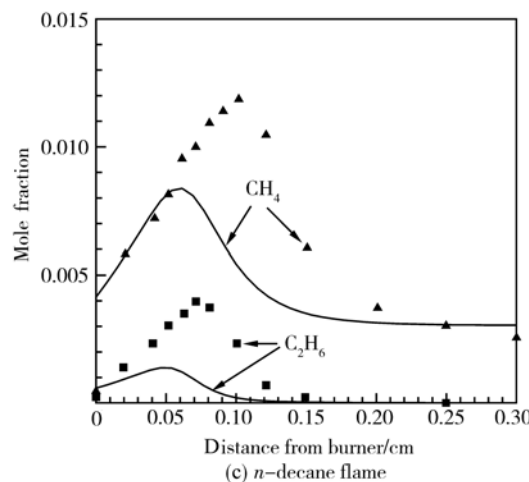
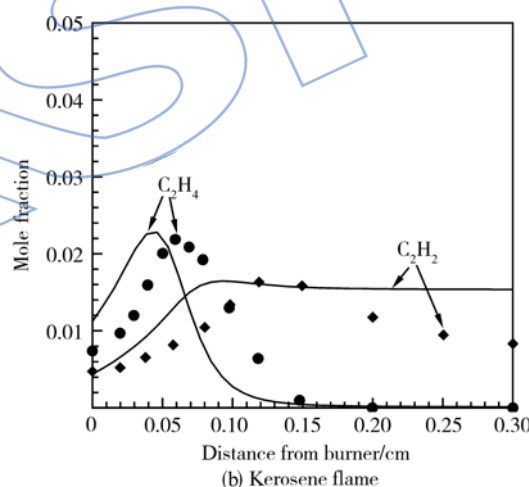
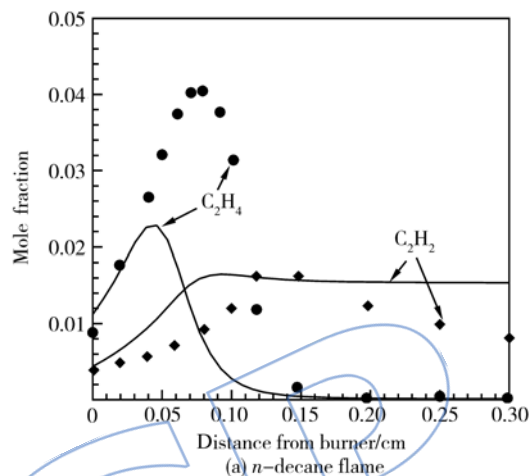
Fig. 5 Effect of the main reaction path on the production rate of CO in n -decane flame

3.4 CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6

图 6 显示了几种典型的 CH_y 与 C_2H_y 组分 (CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6) 摩尔分数的变化趋势。从图 6(a) 与 6(c) 可以看出, 在正癸烷火焰中, C_2H_2 摩尔分数的计算值与实验值吻合较好, 但 CH_4 , C_2H_4 , C_2H_6 摩尔分数的计算值与实验值虽然变化趋势基本一致, 但在数量上, 尤其是摩尔分数峰值上存在一定的差距, 其中 C_2H_4 尤为明显。从图 6(b) 与 6(d) 可以看出, 在航空煤油燃烧中, C_2H_2 摩尔分数的计算值同样与实验值吻合较好;

最为重要的是 C_2H_4 的摩尔分数的计算值与实验值吻合较好; C_2H_6 摩尔分数的计算值与实验值之间同样存在误差, 但与正癸烷火焰相比, 差距已得到一定程度的缩小。

通过对 C_2H_2 生成与消耗的反应流分析, 图 7 显示了 C_2H_2 生成与消耗的主要反应步。



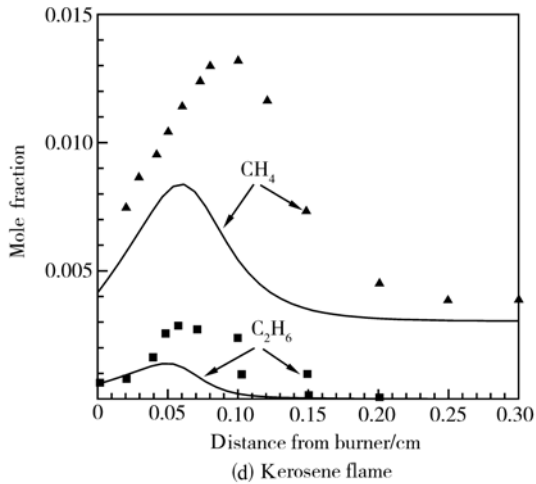


图 6 CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 摩尔分数的变化趋势
(实线为计算值,符号为实验值^[16])

Fig. 6 Mole fractions of CH_4 , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6
(lines: computed data, points: experimental data from Ref. [16])

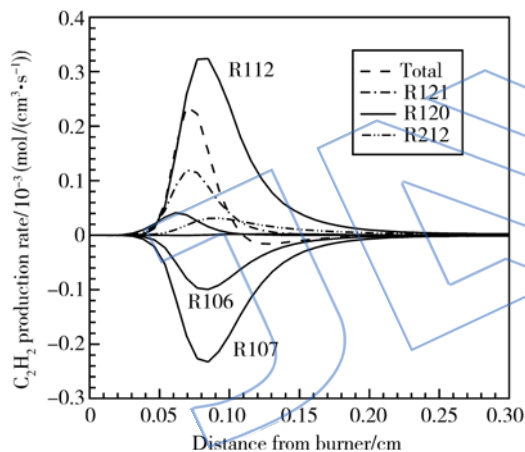
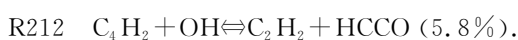
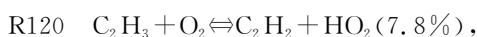
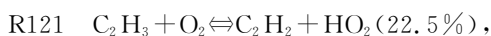


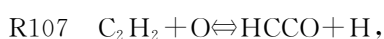
图 7 主要反应步对正癸烷火焰中 C_2H_2 生成速率的影响

Fig. 7 Effect of the main reaction path on the production rate of C_2H_2 in n -decane flame

C_2H_2 主要通过下列反应步生成:



通过下列反应步消耗:



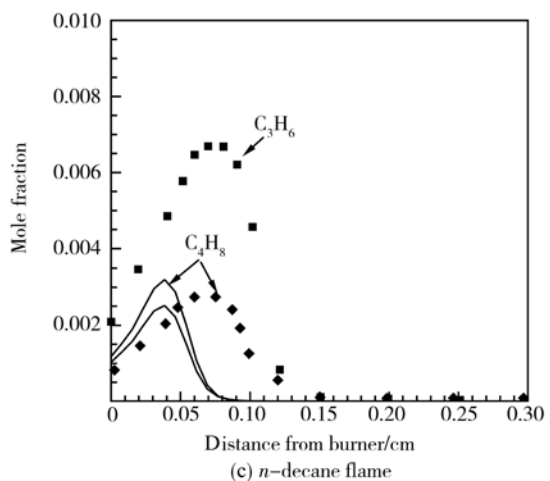
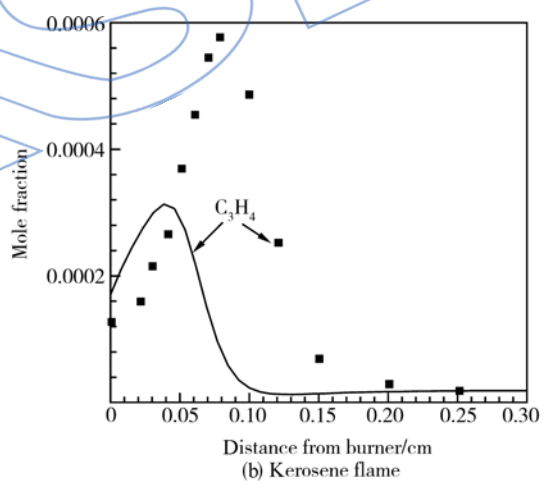
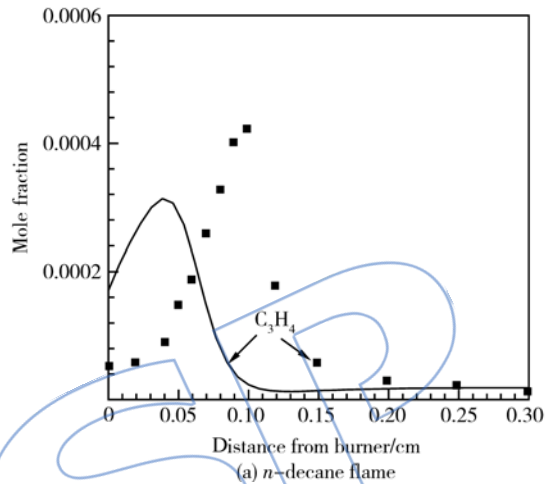
从上述分析可以发现, C_2H_2 主要通过反应步 R112 生成, 通过该反应步 C_2H_2 的生成速率占总

生成速率的 61.7%, 主要通过反应步 R107 消耗。

3.5 C_3H_4 , C_3H_6 , C_4H_8

图 8 显示了几种典型的 C_3H_y 与 C_4H_y 组分 (C_3H_4 , C_3H_6 , C_4H_8) 摩尔分数的变化趋势。

从图可以看出, 无论是在正癸烷火焰还是在航空煤油燃烧中, 虽然三种组分摩尔分数变化趋势的计算值与实验值基本吻合, 但摩尔分数峰值



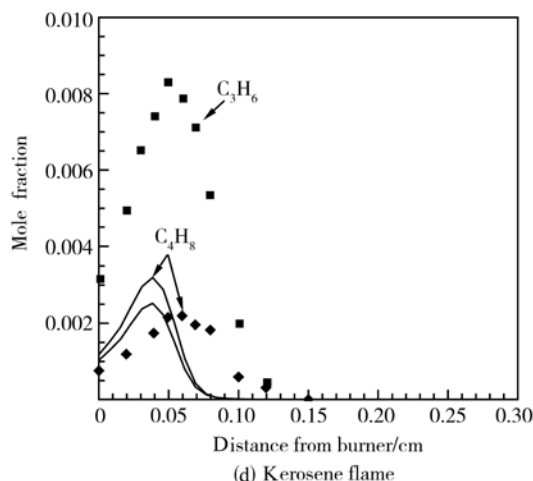


图8 C_3H_4 , C_3H_6 , C_4H_8 摩尔分数的变化趋势
(实线为计算值,符号为实验值^[16])

Fig. 8 Mole fractions of C_3H_4 , C_3H_6 , C_4H_8
lines: computed data, points: experimental
data from Ref. [16])

在炉内出现的位置存在差异,与实验值相比,摩尔分数峰值的计算值更靠近炉壁.同时,与实验值相比, C_3H_4 与 C_3H_6 摩尔分数峰值的计算值都要偏低,但 C_4H_8 则较为接近.

图9显示了 C_3H_4 生成与消耗的主要反应步.从图可以看出, C_3H_4 主要通过下列反应步生成:



通过下列反应步消耗:

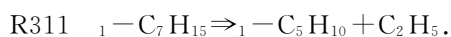


3.6 C_5H_{10} , C_6H_{12}

图10显示了几种典型的 C_5H_y 与 C_6H_y 组分(C_5H_{10} , C_6H_{12})摩尔分数的变化趋势.

从图可以看出,在正癸烷火焰中, C_5H_{10} 摩尔分数的计算值与实验值较为吻合,但 C_6H_{12} 则相差较大,不过整体变化趋势基本一致;与正癸烷火焰相比,在航空煤油燃烧中, C_6H_{12} 摩尔分数的计算值与实验值的差距较小,同时 C_5H_{10} 摩尔分数的计算值要略高于实验值.

图11显示了 C_5H_{10} 生成与消耗的主要反应步.从图可以看出, C_5H_{10} 主要通过下列反应步生成:



通过下列反应步消耗:

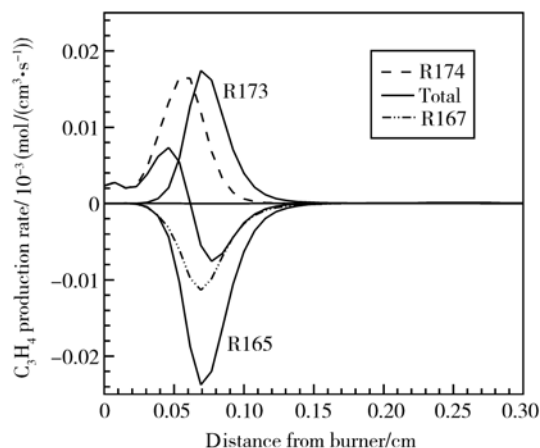
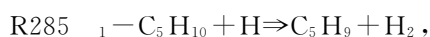


图9 主要反应步对正癸烷火焰中 C_3H_4
生成速率的影响

Fig. 9 Effect of the main reaction path on the
production rate of C_3H_4 in *n*-decane flame

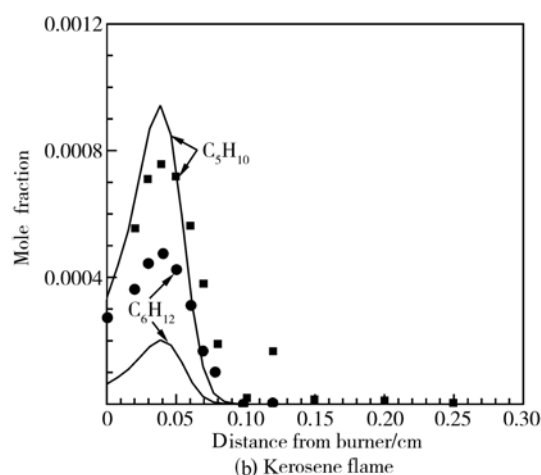
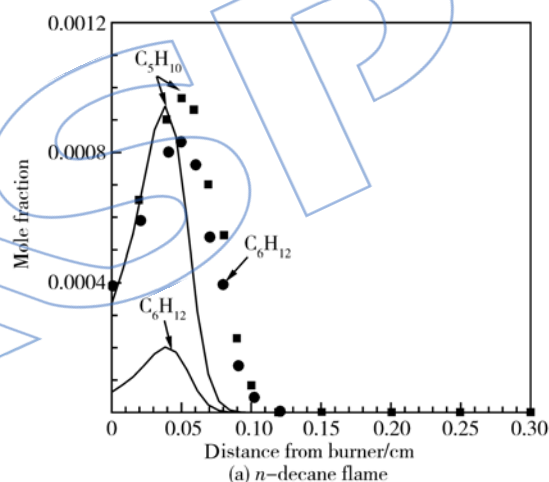


图10 C_5H_{10} , C_6H_{12} 摩尔分数的变化趋势
(实线为计算值,符号为实验值^[16])

Fig. 10 Mole fractions of C_5H_{10} and C_6H_{12}
(lines: computed data, points: experimental
data from Ref. [16])

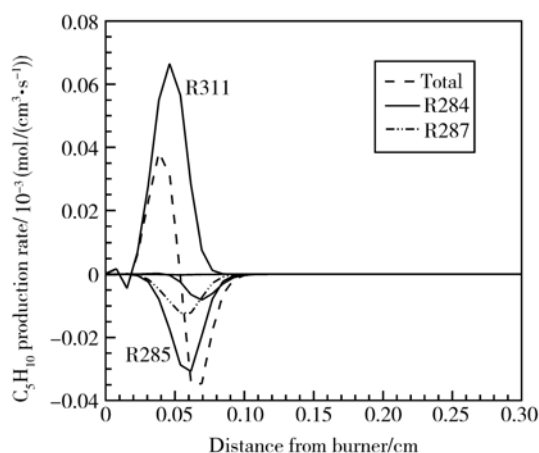
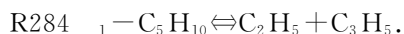


图 11 主要反应步对正癸烷火焰中 C_5H_{10} 生成速率的影响

Fig. 11 Effect of the main reaction path on the production rate of C_5H_{10} in n -decane flame

4 结 论

本文对正癸烷预混燃烧过程进行了详细反应动力学数值模拟,采用了正癸烷着火与燃烧的化学反应详细机理(包括 67 种组分、344 个反应),详细分析了反应物、主要生成物以及各中间组分摩尔分数的变化趋势,并分别与采用正癸烷或航空煤油为燃料的实验数据进行了对比分析,得到以下结论:

1) 通过数值计算所得到的主要反应物($n\text{-C}_{10}\text{H}_{22}$ 与 O_2)摩尔分数的变化趋势与两种燃料(正癸烷与航空煤油)燃烧火焰的实验值较为吻合;同时,通过反应流分析发现正癸烷的消耗主要通过热裂解反应以及 H 、 OH 自由基的提取反应来实现。

2) CO 与 CO_2 摩尔分数的计算值与采用正癸烷为燃料的燃烧火焰的实验值较为吻合, H_2 与 H_2O 摩尔分数的计算值则高于实验值,但整体变化趋势比较吻合; CO_2 、 H_2 摩尔分数的计算值与采用航空煤油为燃料的燃烧火焰的实验值较为吻合,但 CO 、 H_2O 摩尔分数的计算值与实验值差异较大,但整体变化趋势基本吻合。

3) 在采用正癸烷为燃料的燃烧火焰中, C_2H_2 摩尔分数的计算值与实验值吻合较好,但 CH_4 、 C_2H_4 、 C_2H_6 摩尔分数的计算值与实验值虽

然变化趋势基本一致,但在摩尔分数峰值上存在一定的差距;在采用航空煤油为燃料的燃烧火焰中, C_2H_2 、 C_2H_4 摩尔分数的计算值与实验值吻合较好, C_2H_6 摩尔分数的计算值与实验值之间存在一定误差,但与正癸烷火焰相比,差距已得到一定程度的缩小。

4) 无论是在正癸烷火焰还是在航空煤油燃烧中,虽然 C_3H_4 、 C_3H_6 、 C_4H_8 三种组分摩尔分数变化趋势的计算值与实验值基本吻合,但摩尔分数峰值在炉内出现的位置存在差异,与实验值相比,摩尔分数峰值的计算值更靠近炉壁。

5) 在正癸烷火焰中, C_5H_{10} 摩尔分数的计算值与实验值较为吻合,但 C_6H_{12} 则相差较大,不过整体变化趋势基本一致;与正癸烷火焰相比,在航空煤油燃烧中, C_6H_{12} 摩尔分数的计算值与实验值的差距较小,同时 C_5H_{10} 摩尔分数的计算值要略高于实验值。

通过上述分析可以发现,正癸烷预混燃烧火焰与航空煤油燃烧火焰中反应物、生成物与各中间组分摩尔分数的变化趋势基本一致,说明正癸烷可以作为航空煤油的数值模拟代用燃料;同时,本文所提出的详细化学反应机理能很好地描述正癸烷预混燃烧的详细动力学特性。

参考文献:

- [1] 陈思员,徐旭.当量比对单凹腔超燃燃烧室流场影响的三维数值模拟[J].航空学报,2009,30(5):794-799.
CHEN Siyuan, XU Xu. 3D numerical simulation of the influence of fuel equivalence ratio on single cavity supersonic combustor flow[J]. Acta Aeronautica et Astronautica Sinica, 2009, 30(5): 794-799. (in Chinese)
- [2] 赵坚行.民用发动机污染排放及低污染燃烧技术发展趋势[J].航空动力学报,2008,23(6):986-996.
ZHAO Jianxing. Pollutant emission and development of low-emission combustion technology for civil aero engine [J]. Journal of Aerospace Power, 2008, 23(6): 986-996. (in Chinese)
- [3] 郭艳龙,张宝诚,乔娟.某型航空发动机燃烧室排气污染物数值模拟[J].航空发动机,2008(4):38-41.
GUO Yanlong, ZHANG Baocheng, QIAO Juan. Numerical simulation of pollutant emissions from an aeroengine combustor[J]. Aeroengine, 2008(4): 38-41. (in Chinese)
- [4] Dagaut P, Bakali A E, Ristori A. The combustion of kerosene: experimental results and kinetic modeling using 1 to 3 component surrogate model fuels[J]. Fuel, 2006, 85(7-8): 944-956.
- [5] Franzelli B, Riber E, Sanjosé M, et al. A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames[J]. Combustion and Flame, 2010, 157(7): 1364-1373.

- [6] Chrigui M, Moesl K, Ahmadi W, et al. Partially premixed prevaporized kerosene spray combustion in turbulent flow [J]. *Experimental Thermal and Fluid Science*, 2010, 34(3):308-315.
- [7] Wen Z, Yun S, Thomson M J, et al. Modeling soot formation in turbulent kerosene/air jet diffusion flames [J]. *Combustion and Flame*, 2003, 135(3):323-340.
- [8] Delfau J L, Bouhria M, Reuillon M, et al. Experimental and computational investigation of the structure of a sooting decane-O₂-Ar flame [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 1990, 23(2):1567-1572.
- [9] Dagaut P, Reuillon M, Cathonnet M. High pressure oxidation of liquid fuels from low to high temperature. 3. *n*-decane [J]. *Combustion Science and Technology*, 1994, 103(2):349-359.
- [10] Dagaut P, Reuillon M, Boettner J C, et al. Kerosene combustion at pressures up to 40 atm: experimental study and detailed chemical kinetic modeling [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 1994, 25(2):919-926.
- [11] Pfahl U, Fieweger K, Adomeit G. Self-ignition of diesel-relevant hydrocarbon-air mixtures under engine conditions [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 1996, 26(1):781-789.
- [12] Lindstedt P, Maurice L Q. Detailed chemical kinetic model for aviation fuels [J]. *Journal of Propulsion and Power*, 2000, 16(1):187-195.
- [13] Bikas G, Peters N. Kinetic modelling of *n*-decane combustion and autoignition [J]. *Combustion and Flame*, 2001, 126(1-2):1456-1475.
- [14] Honnet S, Seshadri K, Niemann U, et al. A surrogate fuel for kerosene [J]. *Proceedings of the Combustion Institute*, 2009, 32(1):485-492.
- [15] Robert J K, Fran M R, Ellen M, et al. CHEMKIN-III: a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical and plasma kinetics [R]. Sandia National Laboratory, Livermore, USA; CA94551-0969, 1996.
- [16] Douté C, Delfau J L, Akrich R, et al. Chemical structure of atmospheric pressure premixed *n*-decane and kerosene flames [J]. *Combustion Science and Technology*, 1995, 106(2):327-344.